

# Компьютерное моделирование магниточувствительных везикул

Рыжков А. В.<sup>1</sup>, Райхер Ю. Л.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт механики сплошных сред УрО РАН – филиал ПФИЦ УрО РАН, Пермь, Россия

Электронная почта ответственного автора: [ryzhkovalexandr@gmail.com](mailto:ryzhkovalexandr@gmail.com)

Искусственные контейнеры для внутриклеточной доставки и высвобождения веществ имеют перспективные биомедицинские применения. В частности, полимерные капсулы, функционализированные магнитными наночастицами (магниточувствительные везикулы или полимеросомы [1]), могут стать основой для систем дистанционно управляемого транспорта лекарств, а их способность к деформированию в магнитном поле открывает пути для создания нанохирургических инструментов. Несмотря на растущее число экспериментальных работ на данный момент остается открытым вопрос развитых модельных представлений о поведении магнитных полимеросом в широком диапазоне материальных параметров и особенностей строения этих объектов. Работа нацелена на построение и реализацию модели, которая позволила бы на основе анализа сценариев отклика на магнитное и механическое воздействие предложить оптимальные настройки свойств магнитополимерных контейнеров.

Предлагается гибкая расширенная модель на основе подхода крупнозернистой молекулярной динамики, учитывающая возможные форму, размеры и толщину везикулярной мембраны; концентрацию и магнитные свойства наночастиц; взаимодействие двух подсистем – макромолекулярной оболочки и частиц магнитоактивного наполнителя (Рис. 1). Модель реализуется с помощью программного обеспечения ESPResSo [2]. Представлены результаты моделирования поведения несферической магниточувствительной везикулы в приложенном однородном магнитном поле. Проанализированы особенности связанного магнитомеханического и структурного отклика.

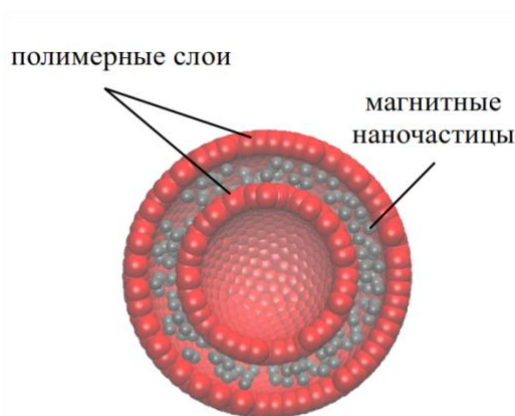


Рисунок 2 – Схематическое представление модельной магниточувствительной везикулы

- [1] H. Oliveira, E. Pérez-Andrés, J. Thevenot, O. Sandre, E. Berra, and S. Lecommandoux, J. Control. Release, 169, (2013) 165.
- [2] F. Weik, R. Weeber, K. Szuttor, K. Breitsprecher, J. de Graaf, M. Kuron, J. Landsgesell, H. Menke, D. Sean, and C. Holm, Eur. Phys. J. Spec. Top., 227 (2019) 1789.